

## PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 09-050458

(43)Date of publication of application : 18.02.1997

(51)Int.Cl.

G06F 17/50  
// G06F 17/00

(21)Application number : 07-204235

(71)Applicant : HITACHI LTD

(22)Date of filing : 10.08.1995

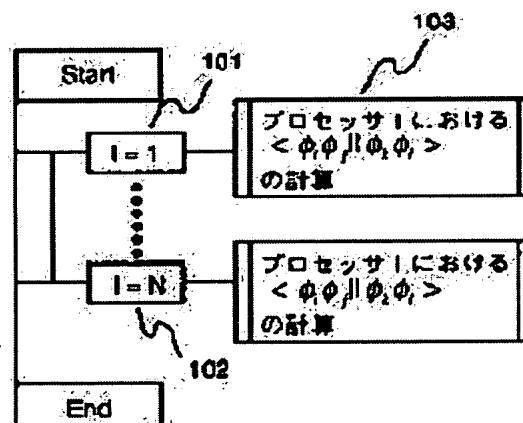
(72)Inventor : TAKEMURA YOSHIAKI  
MARUIZUMI TAKUYA  
USHIO JIRO  
YURUGEN SHIYURUTEI

## (54) METHOD FOR CALCULATING 2 ELECTRONIC INTEGRATION RELATING TO MOLECULAR ORBIT

## (57)Abstract:

**PROBLEM TO BE SOLVED:** To perform a high-speed calculation in a system with a large number of processors by dividing repetitive calculation by the number of a molecular orbit and executing the calculation of 2 electronic integration relating to the molecular orbit in the respective processors in parallel by utilizing the partial sum of the 2 electronic integration.

**SOLUTION:** The processor number I is set to 1 in the first processor 101, a processing 103 is executed and molecular integration  $\langle \phi_i | \phi_j \rangle$  in the processor of the number I is calculated in the processing 103. Thus, the generation of a calculation processing proportional to the number of the processors is prevented and a high-speed calculation the system with a large number of processors is made possible.



## LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's  
decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平9-50458 ✓

(43) 公開日 平成9年(1997)2月18日

(51) Int.Cl. <sup>8</sup>	識別記号	庁内整理番号	F I	技術表示箇所
G 0 6 F 17/50			G 0 6 F 15/60	6 3 8
// G 0 6 F 17/00				6 1 2 G
		7925-5L	15/20	D

審査請求 未請求 請求項の数 1 O L (全 14 頁)

(21) 出願番号 特願平7-204235

(22) 出願日 平成7年(1995)8月10日

(71) 出願人 000005108

株式会社日立製作所

東京都千代田区神田駿河台四丁目6番地

(72) 発明者 竹村 佳昭

東京都国分寺市東恋ヶ窪1丁目280番地

株式会社日立製作所中央研究所内

(72) 発明者 丸泉 琢也

東京都国分寺市東恋ヶ窪1丁目280番地

株式会社日立製作所中央研究所内

(72) 発明者 牛尾 二郎

東京都国分寺市東恋ヶ窪1丁目280番地

株式会社日立製作所中央研究所内

(74) 代理人 弁理士 小川 勝男

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 分子軌道に関する2電子積分の計算方法

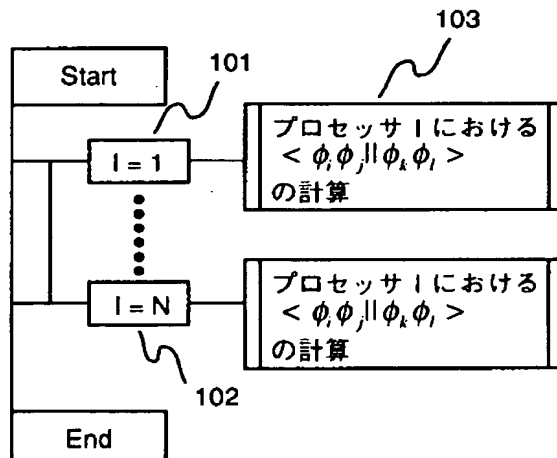
(57) 【要約】

【目的】 分子軌道の番号による繰返し計算を分割し、各プロセッサでは分子軌道に関する2電子積分の計算を、2電子積分の部分和を利用し並列に実行することにより、プロセッサ数の大きなシステムでの高速計算を可能とする。

【構成】 101でプロセッサ番号Iを1とし、処理103を実行、103で番号Iのプロセッサにおける分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ を計算する

【効果】 プロセッサ数に比例した計算処理の発生を防ぎ、プロセッサ数の大きなシステムでの高速計算を可能とする。

図 1



1

## 【特許請求の範囲】

【請求項1】分子軌道法計算における分子軌道に関する2電子積分計算をN個のプロセッサで並列に行う計算方法であって、

前記分子軌道の総数をm、原子軌道の総数をm'とし、Iを前記プロセッサの番号を表す正の整数とし、おのの $1 \leq i \leq m$ 、 $1 \leq j \leq m$ 、 $1 \leq k \leq m$ 及び $1 \leq l \leq m$ なる値をとる整数i、j、k及びlを前記分子軌道の番号とし、おのの $1 \leq p \leq m'$ 、 $1 \leq q \leq m'$ 、 $1 \leq r \leq m'$ 及び $1 \leq s \leq m'$ なる値をとる整数p、q、r及びsを前記原子軌道の番号とし、i番目の前記分子軌道 $\phi_i$ を前記原子軌道の線形結合として表記した場合のp番目の前記原子軌道 $\chi_p$ の係数が行列要素 $U_{pi}$ で表されるような係数行列Uの全ての要素の値をあらかじめ持ち、電子1と電子2の距離の逆数に、電子1の座標を有する分子軌道 $\phi_i$ の複素共役、電子1の座標を有する分子軌道 $\phi_j$ 、電子2の座標を有する分子軌道 $\phi_k$ の複素共役及び電子2の座標を有する分子軌道 $\phi_l$ を乗じ電子1及び電子2の座標に関して全空間で積分した結果を分子軌道に関する2電子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ とし、電子1と電子2の距離の逆数に、電子1の座標を有する原子軌道 $\chi_p$ の複素共役、電子1の座標を有する原子軌道 $\chi_q$ 、電子2の座標を有する原子軌道 $\chi_r$ の複素共役及び電子2の座標を有する原子軌道 $\chi_s$ を乗じ電子1及び電子2の座標に関して全空間で積分した結果を原子軌道に関する2電子積分 $\langle p q | | r s \rangle$ とし、前記全ての整数p、q、r、sの組に対して、前記原子軌道に関する2電子積分 $\langle p q | | r s \rangle$ の計算結果をあらかじめ持ち、前記原子軌道に関する2電子積分 $\langle p$

$$\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle = \int \frac{\phi_i^*(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_1) \phi_k^*(\mathbf{r}_2) \phi_l(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

... (数1)

【0004】ここで、i、j、k、lは分子軌道の番号を表わす正の整数であり、 $r_1$ 及び $r_2$ は電子の座標を表わし、 $r_{12}$ は電子1及び電子2の距離を表わす。分子軌道 $\phi_i$ は、数2の様に原子軌道 $\chi_p$  ( $1 \leq p \leq m'$ )の線形結合(LCAO: near Combin

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \sum_{p=1}^{m'} \chi_p(\mathbf{r}) U_{pi}$$

【0006】ここで、 $U_{pi}$ は、原子軌道を分子軌道へ変換するための係数行列の行列要素、 $m'$ は線形結合に用いる原子軌道数を表わす。

【0007】数1及び数2から、前述の分子軌道に関する

2

$q | | r s \rangle$ に、前記係数行列の行列要素 $U_{rk}$ の複素共役、行列要素 $U_{qj}$ 、行列要素 $U_{sl}$ を乗じたものを前記全てのq、r、sについて和したものを2電子積分の部分 $c_{pjkl}$ とし、前記iの変域を連続するN個の領域に分割し、前記分割されたN個の領域の第I番目の領域の最小値及び最大値をそれぞれ $N_1(I)$ 及び $N_2(I)$ とし、I番目の前記プロセッサにおける計算処理において、おのの $N_1(I) \leq i \leq N_2(I)$ 、 $1 \leq j \leq m$ 、 $1 \leq k \leq m$ 及び $1 \leq l \leq m$ なる値をとる整数i、j、k及びlの全ての組に対して、前記係数行列の行列要素 $U_{pi}$ の複素共役に前記2電子積分の部分 $c_{pjkl}$ を乗じたものを前記全てのpの値について和したものを前記分子軌道に関する2電子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ の値とする分子軌道に関する2電子積分の計算方法。

## 【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】本発明は、原子分子の大きさで材料特性を予測するシミュレーションである分子軌道法において、分子軌道に関する2電子積分の計算方法に関する。

【0002】

【従来の技術】分子軌道法計算においては、Fock行列や配置間相互作用における対角化行列の行列要素や、全エネルギー等の物理量計算のために、数1で表わされる2電子積分の数値を求める必要がある。

【0003】

【数1】

ation of Atomic Orbital)で表わされる。

【0005】

【数2】

... (数2)

る2電子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ は、数3の様に表わされる。

【0008】

【数3】

$$\langle \phi_i \phi_j | \phi_k \phi_l \rangle = \sum_{p=1}^{m'} \sum_{q=1}^{m'} \sum_{r=1}^{m'} \sum_{s=1}^{m'} U_{pi}^* U_{qj} U_{rk}^* U_{sl} \langle pq || rs \rangle$$

... (数3)

【0009】ここで、 $\langle pq || rs \rangle$ は、原子軌道に関する2電子積分であって、数4の様に定義される。

【0010】

【数4】

$$\langle pq || rs \rangle = \int \frac{\chi_p^*(\mathbf{r}_1) \chi_q(\mathbf{r}_1) \chi_r^*(\mathbf{r}_2) \chi_s(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

... (数4)

【0011】実際の数値計算においては、個々の原子軌道はスレータ型軌道(STO: Slater Type Orbital)やガウス型軌道(GTO: Gaussian Type Orbital)が用いられ、まず入力データで定義された原子軌道の全ての組に対して前記原子軌道に関する2電子積分 $\langle pq || rs \rangle$ を解析的に全て計算しておく。数3に示されるような前記分

$$m^4 (m')^4$$

子軌道に関する2電子積分は、 $\langle pq || rs \rangle$ と係数行列 $U_{pi}$ との積和計算である。

【0012】このとき、全ての分子軌道の組(i, j, k, l)に対して数3に示される数値計算を行うための繰り返し計算の数は、分子軌道数をmとすれば

【0013】

【数5】

... (数5)

【0014】となる。実際の数値計算では  $m \leq m'$

となることが多いため、数5は $m'$ の8次以下と見積もることが出来る。

【0015】このため、従来技術では前記原子軌道に関する2電子積分の部分積和をとることによりこの繰り返し計算数の次数をさげる工夫が行われてきた。

【0016】以下、従来技術を図面を用いて説明する。

【0017】なお、本明細書における以下の記述では、簡単の為に、前記分子軌道に関する2電子積分を「分子積分」、前記原子軌道に関する2電子積分を「原子積分」と記す。また、特別に断りの無い限り、計算に使用する分子軌道及び原子軌道の個数は、それぞれm及び $m'$ である。

【0018】図4は、本発明に関する従来技術の処理手順を示す図である。

【0019】401は、繰り返し数カウンタpが1から $m'$ まで1ずつ増加する間、一連の処理402、403及び404をこの順序で繰り返すことを示す。

【0020】402では、全ての正の整数の組(i, j, k, l)に対して分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | \phi_k \phi_l \rangle$ の値を0とする。ここで、i, j, k, lの値はそれぞれ

$1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m, 1 \leq l \leq m$ である。

【0021】403は、2電子積分の部分積和 $c_{pjkl}$ を計算する処理であり、この内容は別に記述する。

【0022】404は、繰り返し数カウンタiが1からmまで1ずつ増加する間、処理405を繰り返すことを示す。

【0023】405は、繰り返し数カウンタjが1からmまで1ずつ増加する間、処理406を繰り返すことを示す。

【0024】406は、繰り返し数カウンタkが1からmまで1ずつ増加する間、処理407を繰り返すことを示す。

【0025】407は、繰り返し数カウンタlが1からmまで1ずつ増加する間、処理408を繰り返すことを示す。

【0026】408では、原子軌道を分子軌道へ変換するための係数行列の行列要素 $U_{pi}$ の複素共役と処理403で計算した2電子積分の部分積和 $c_{pjkl}$ との積を分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | \phi_k \phi_l \rangle$ に加え、この結果を $\langle \phi_i \phi_j | \phi_k \phi_l \rangle$ の新しい値とする。

【0027】図3は、本発明に関する従来技術及び本発明の一実施例において、2電子積分の部分積和 $c_{pjkl}$ を計算する処理403の内容を示す図である。

【0028】403は、一連の処理301、302、303及び304がこの順序で行われることにより、2電子積分の部分積和 $c_{pjkl}$ が計算されることを示す。

## 5

【0029】301は、全ての正の整数の組  $(p, q, r, j, k, l)$  に対して部分積  $a p q r l$ 、 $b p q k l$ 、 $c p j k l$  の値をそれぞれ0とすることを示す。ここで、 $p, q, r, j, k, l$  の値はそれぞれ  $1 \leq p \leq m$ 、 $1 \leq q \leq m$ 、 $1 \leq r \leq m$ 、 $1 \leq j \leq m$ 、 $1 \leq k \leq m$ 、 $1 \leq l \leq m$  である。

【0030】302では、前記数2で表されるような原子軌道を分子軌道へ変換する係数行列  $U$  の行列要素を全て読み込む。ここで、行列  $U$  は、 $m'$  行  $m$  列の行列である。303では、全ての正の整数の組  $(p, q, r, s)$  に対して、原子積分  $\langle p q | | r s \rangle$  の値を読み込む。

【0031】304は、繰返し数カウンタ  $q$  が1から  $m'$  まで1ずつ増加する間、一連の処理305及び306をこの順序で繰り返すことを示す。

【0032】305は、繰返し数カウンタ  $r$  が1から  $m'$  まで1ずつ増加する間、一連の処理307及び308を繰り返すことを示す。

【0033】307は、繰返し数カウンタ  $s$  が1から  $m'$  まで1ずつ増加する間、処理309を繰り返すことを示す。

【0034】309は、繰返し数カウンタ  $l$  が1から  $m$  まで1ずつ増加する間、処理310を繰り返すことを示す。

【0035】310では、係数行列  $U$  の行列要素  $U s l$  と原子積分  $\langle p q | | r s \rangle$  との積を部分積  $a p q r l$  に加え、その結果を  $a p q r l$  の新しい値とする。

【0036】308は、繰返し数カウンタ  $k$  が1から  $m$  まで1ずつ増加する間、処理311を繰り返すことを示す。

【0037】311は、繰返し数カウンタ  $l$  が1から  $m$

$$x(m')^4$$

【0046】および

【0047】

$$y(m')^4$$

【0048】とする。

【0049】また、404、405、406、407及び408からなる処理の繰返し計算数を

$$x(m')^4$$

【0051】とする。

【0052】このとき、図3及び図4における処理の繰返し計算数は

## 6

まで1ずつ増加する間、処理312を繰り返すことを示す。

【0038】312では、係数行列  $U$  の行列要素  $U r k$  の複素共役と部分積  $a p q r l$  との積を部分積  $b p q k l$  に加え、その結果を  $b p q k l$  の新しい値とする。

【0039】306は、繰返し数カウンタ  $j$  が1から  $m$  まで1ずつ増加する間、処理313を繰り返すことを示す。

【0040】313は、繰返し数カウンタ  $k$  が1から  $m$  まで1ずつ増加する間、処理314を繰り返すことを示す。

【0041】314は、繰返し数カウンタ  $l$  が1から  $m$  まで1ずつ増加する間、処理315を繰り返すことを示す。

【0042】315では、係数行列  $U$  の行列要素  $U q j$  と部分積  $b p q k l$  との積を部分積  $c p j k l$  に加え、その結果を  $c p j k l$  の新しい値とする。

【0043】以上、図4及び図3に見られるように、処理401は  $m'$  の1次、処理402及び403はともに  $m'$  の4次の繰返し数と見積もれる。また、404、405、406、407及び408からなる処理の合計は  $m'$  の4次の繰返し数と見積もれる。従って、図4及び図3に記述された従来技術では、全ての分子軌道の組  $(i, j, k, l)$  に対して数3に示される数値計算を行うための繰返し計算の数は、 $m'$  の5次となる。

【0044】ここで、以下の記述における繰返し計算の数比較のため、処理402及び403の繰返し計算数をそれぞれ

【0045】

30 【数6】

... (数6)

【数7】

... (数7)

【0050】

【数8】

... (数8)

【0053】

【数9】

$$7$$

$$(x+y+z)(m')^5$$

... (数9)

【0054】となる。

【0055】これに類似の技術は、例えば、「Methods of Electronic Structure Theory」第6章205頁ないし208頁（編集者 Henry F. Schaefer III、前記該当箇所の執筆者 Isaiah Shavitt、1977年、アメリカ合衆国ニューヨーク州Plenum Press社発行）に記されている。

【0056】

【発明が解決しようとする課題】上記従来技術は主としてノイマン型計算機を対象として用いられてきた。しかし、近年、並列計算機を使用した高速計算技術が発展してきており、上記従来技術も並列計算機上で実行し計算を高速化することが期待されている。

【0057】上記従来技術を並列計算処理するための基本的な方法は、最も上位に位置する繰返し401を分割して各プロセッサに処理させることである。以下、この場合の問題点を、図面を用いて説明する。

【0058】なお、以下の記述において、並列計算機を構成する並列なプロセッサ数をNとする。

【0059】図5は、本発明に関する従来技術において、最も上位に位置する繰返し401を分割して各プロセッサに並列処理させる手順を示したものである。

【0060】501は、1番目のプロセッサにおいて、プロセッサ番号Jを1とし、処理502を実行することを示す。

【0061】503は、N番目のプロセッサにおいて、プロセッサ番号JをNとし、処理502を実行することを示す。

【0062】ここで、501及び503に記述された処理内容は、2番目以降（N-1）番目のプロセッサにおいても同様である。

【0063】また、501及び503は、1番目からN番目までの個々のプロセッサ上でそれぞれ処理502が行われること、及び1番目からN番目までの全てのプロセッサ上で処理502が終了した後に処理504が行われることを示している。

【0064】502は、番号Jのプロセッサにおける分子積分の部分積和 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle [J]$ を計算する処理であり、この内容は別に記述する。

【0065】504では、全ての正の整数の組（i, j, k, l）に対して分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ の値を0とする。ここで、i, j, k, lの値はそれぞれ

$$1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m, 1 \leq l \leq m$$

である。

【0066】505は、繰返し数カウンタiが1からmまで1ずつ増加する間、処理506を繰り返すことを示す。

【0067】506は、繰返し数カウンタjが1からmまで1ずつ増加する間、処理507を繰り返すことを示す。

【0068】507は、繰返し数カウンタkが1からmまで1ずつ増加する間、処理508を繰り返すことを示す。

【0069】508は、繰返し数カウンタlが1からmまで1ずつ増加する間、処理509を繰り返すことを示す。

【0070】509は、繰返し数カウンタJが1からNまで1ずつ増加する間、処理510を繰り返すことを示す。

【0071】510では、処理502で計算した分子積分の部分積和 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle [J]$ を分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ に加え、この結果を $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ の新しい値とする。

【0072】図6は、本発明に関する従来技術において、最も上位に位置する繰返し401を分割して各プロセッサに並列処理させる場合、502の処理を示したものである。

【0073】502は、一連の処理601、602及び603がこの順序で行われることにより番号Jのプロセッサにおける分子積分の部分積和 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle [J]$ が計算されることを示したものである。

【0074】601では、NPの値をINT（m' / N）とする。

【0075】ここで、INT（x）は、実数xの絶対値を超えない最大の整数値に、xと同一の符号をつけた整数値を表す。

【0076】602では、JとNとの大小を比較し、J < Nの場合には処理604を実行し、それ以外の場合には処理605を実行する。

【0077】604では、p1の値を（J-1）×NP+1とし、p2の値をJ×NPとする。

【0078】605では、p1の値を（J-1）×NP+1とし、p2の値をm' とする。603は、繰返し数カウンタpがp1からp2まで1ずつ増加する間、一連の処理606、403及び607をこの順序で繰り返すことを示す。

【0079】606は、全ての正の整数の組（i, j, k, l）に対して分子積分の部分積和 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$

$\phi l > [J]$  の値を 0 とする。ここで、 $i, j, k, l$  の値はそれぞれ

$$1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m, 1 \leq l \leq m$$

である。

【0080】403は、2電子積分の部分積  $c p j k l$  を計算する処理であり、この内容は別に記述する。

【0081】607は、繰返し数カウンタ  $i$  が 1 から  $m$  まで 1 ずつ増加する間、処理 608 を繰り返すことを示す。

【0082】608は、繰返し数カウンタ  $j$  が 1 から  $m$  まで 1 ずつ増加する間、処理 609 を繰り返すことを示す。

【0083】609は、繰返し数カウンタ  $k$  が 1 から  $m$  まで 1 ずつ増加する間、処理 610 を繰り返すことを示す。

【0084】610は、繰返し数カウンタ  $l$  が 1 から  $m$  まで 1 ずつ増加する間、処理 611 を繰り返すことを示す。

【0085】611では、原子軌道を分子軌道へ変換するための係数行列の行列要素  $U p i$  の複素共役と処理 403 で計算した 2 電子積分の部分積  $c p j k l$  との積を分子積分の部分積  $\langle \phi i \phi j | | \phi k \phi l \rangle [J]$  に加え、この結果を  $\langle \phi i \phi j | | \phi k \phi l \rangle [J]$  の新し

$$\frac{1}{N} (x + y + z) (m')^5$$

【0093】となる。

【0094】すなわち、並列化により繰返し数が図 4 の場合の  $(1/N)$  倍となる利点がある。

【0095】しかし、501、502 及び 503 の処理だけでは、分子積分  $\langle \phi i \phi j | | \phi k \phi l \rangle$  の計算は未だ終了せず、各プロセッサ  $J$  で分子積分の部分積  $\langle \phi i \phi j | | \phi k \phi l \rangle [J]$  の計算が終了した状態になる。したがって、新たに 504、505、506、507、508、509 及び 510 の一連の処理による分子

$$Nz(m')^4$$

【0098】となる。

【0099】すなわち、プロセッサ数  $N$  に比例する処理が余計に発生する。

【0100】この結果、プロセッサ数の大きなシステムになるほど、数 11 に示される様な処理数の増大をまねき、数 10 に示される様な処理数減少すなわち計算高速化の利点が損なわれ易くなるという問題点があった。

【0101】本発明は、前記問題点を解決するためになされたものである。

【0102】本発明の目的は、分子軌道に関する 2 電子

い値とする。

【0086】以上、従来技術において 401 を分割して各プロセッサに並列処理させる場合の処理手順を説明した。

【0087】ここで、図 3 及び図 4 の様に従来技術をノイマン型計算機で実施した場合と、上記図 5 及び図 6 に示した場合とで繰返し計算数を比較する。

【0088】図 5 及び図 6 に示した場合、繰返し数が  $m'$  の最大次数となる部分は 501、502 及び 503 の部分である。

【0089】まず、502 の繰返し計算数において、並列化により 603 の繰返し計算数は  $(m' / N)$  である。

【0090】次に、606 の繰返し計算数は 402 と同等で上述の数 6 となる。また、403 の繰返し計算数は前述の数 7 のようになる。さらに、一連の処理 607、608、609、610 及び 611 は 404、405、406、407 及び 408 からなる処理と同等の繰返し計算数で、上述の数 8 となる。

【0091】従って、501、502 及び 503 の部分の繰返し計算数は

【0092】

【数 10】

... (数 10)

積分  $\langle \phi i \phi j | | \phi k \phi l \rangle$  の計算が必要となる。

【0096】まず、504 の繰返し計算数は 402 と同等で上述の数 6 となる。次に、505、506、507、508、509 及び 510 の一連の処理の繰返し計算数は 404、405、406、407 及び 408 からなる処理の  $N$  倍と同等で、

【0097】

【数 11】

... (数 11)

積分計算において、プロセッサ数の大きなシステムにおいても、並列化による計算高速化の利点が損なわれない様にすることにある。

【0103】

【課題を解決するための手段】上記目的は、分子軌道法計算における分子軌道に関する 2 電子積分計算を  $N$  個のプロセッサで並列に行う計算方法において、前記分子軌道の総数を  $m$ 、原子軌道の総数を  $m'$  とし、 $I$  を前記プロセッサの番号を表す正の整数とし、おのの  $1 \leq i \leq m$ 、 $1 \leq j \leq m$ 、 $1 \leq k \leq m$  及び  $1 \leq l \leq m$  なる値をと



る整数  $i, j, k$  及び  $l$  を前記分子軌道の番号とし、おのの  $1 \leq p \leq m', 1 \leq q \leq m', 1 \leq r \leq m'$  及び  $1 \leq s \leq m'$  なる値をとる整数  $p, q, r$  及び  $s$  を前記原子軌道の番号とし、 $i$  番目の前記分子軌道  $\phi_i$  を前記原子軌道の線型結合として表記した場合の  $p$  番目の前記原子軌道  $\chi_p$  の係数が行列要素  $U_{pi}$  で表されるような係数行列  $U$  の全ての要素の値をあらかじめ持ち、電子 1 と電子 2 の距離の逆数に、電子 1 の座標を有する分子軌道  $\phi_i$  の複素共役、電子 1 の座標を有する分子軌道  $\phi_j$ 、電子 2 の座標を有する分子軌道  $\phi_k$  の複素共役及び電子 2 の座標を有する分子軌道  $\phi_l$  を乗じ電子 1 及び電子 2 の座標に関して全空間で積分した結果を分子軌道に関する 2 電子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  とし、電子 1 と電子 2 の距離の逆数に、電子 1 の座標を有する原子軌道  $\chi_p$  の複素共役、電子 1 の座標を有する原子軌道  $\chi_q$ 、電子 2 の座標を有する原子軌道  $\chi_r$  の複素共役及び電子 2 の座標を有する原子軌道  $\chi_s$  を乗じ電子 1 及び電子 2 の座標に関して全空間で積分した結果を原子軌道に関する 2 電子積分  $\langle p q | | r s \rangle$  とし、前記全ての整数  $p, q, r, s$  の組に対して、前記原子軌道に関する 2 電子積分  $\langle p q | | r s \rangle$  の計算結果をあらかじめ持ち、前記原子軌道に関する 2 電子積分  $\langle p q | | r s \rangle$  に、前記係数行列の行列要素  $U_{rk}$  の複素共役、行列要素  $U_{qj}$ 、行列要素  $U_{sl}$  を乗じたものを前記全ての  $q, r, s$  について和したものを 2 電子積分の部分  $c_{pjkl}$  とし、前記  $i$  の変域を連続する  $N$  個の領域に分割し、前記分割された  $N$  個の領域の第  $I$  番目の領域の最小値及び最大値をそれぞれ  $N1(I)$  及び  $N2(I)$  とし、 $I$  番目の前記プロセッサにおける計算処理において、おのの  $N1(I) \leq i \leq N2(I), 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m$  及び  $1 \leq l \leq m$  なる値をとる整数  $i, j, k$  及び  $l$  の全ての組に対して、前記係数行列の行列要素  $U_{pi}$  の複素共役に前記 2 電子積分の部分  $c_{pjkl}$  を乗じたものを前記全ての  $p$  の値について和したものを前記分子軌道に関する 2 電子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  の値とすることにより達成される

【0104】

【作用】分子軌道の数を  $m$ 、原子軌道の数を  $m'$  とする。

【0105】このとき、分子軌道に関する 2 電子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  は、上述の数 1 の様に定義される。

【0106】また、分子軌道  $\phi_i$  は、上述の数 2 の様に原子軌道  $\chi_p$  ( $1 \leq p \leq m'$ ) の線形結合で定義され

$$c_{pjkl} = \sum_{q=1}^{m'} \sum_{r=1}^{m'} \sum_{s=1}^{m'} U_{qj} U_{rk}^* U_{sl} \langle pq || rs \rangle$$

る。

【0107】ここで、 $U_{pi}$  は、原子軌道を分子軌道へ変換するための係数行列の行列要素、 $m'$  は線形結合に用いる原子軌道数を表わす。

【0108】数 1 及び数 2 から、前述の分子軌道に関する 2 電子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  は、数 3 の様に表わされる。

【0109】ここで、 $\langle p q | | r s \rangle$  は、原子軌道に関する 2 電子積分であって、数 4 の様に定義される。

10 【0110】いま、全ての正の整数の組  $(i, j, k, l)$  に対して分子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  の値を数 3 の関係に基づき計算する処理を、 $N$  個のプロセッサで並列に処理させる。

【0111】ここで、 $i, j, k, l$  の値はそれぞれ  $1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m, 1 \leq l \leq m$  である。

【0112】プロセッサ  $I$  において、以下の処理をおこなう。

20 【0113】まず、 $NI$  の値を  $INT(m/N)$  とする。

【0114】ここで、 $INT(x)$  は、実数  $x$  の絶対値を超えない最大の整数値に、 $x$  と同一の符号をつけた整数値を表す。

【0115】次に、 $N1$  の値を  $(I-1) \times NI + 1$  とする。

【0116】次に、 $I$  と  $N$  との大小を比較し、 $I < N$  の場合には  $N2$  の値を  $I \times NI$  とし、それ以外の場合には  $N2$  の値を  $m$  とする。

30 【0117】そして、全ての正の整数の組  $(i, j, k, l)$  に対して分子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  の値を 0 とする。ここで、 $i, j, k, l$  の値はそれぞれ  $N1 \leq i \leq N2, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m, 1 \leq l \leq m$  である。

【0118】そして、繰返し数カウンタ  $p$  が 1 から  $m'$  まで 1 ずつ増加する間、はじめに数 12 で定義される 2 電子積分の部分  $c_{pjkl}$  を計算し、次に原子軌道を分子軌道へ変換するための係数行列の行列要素  $U_{pi}$  の複素共役と後述する数 12 で定義される 2 電子積分の部分  $c_{pjkl}$  との積を分子積分  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  に加え、この結果を  $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$  の新しい値とする。

【0119】

【数 12】

... (数 12)

【0120】

【実施例】以下、本発明請求項1の実施例を図面を用いて説明する。

【0121】図1は、本発明の一実施例の処理手順を示す図である。

【0122】101は、1番目のプロセッサにおいて、プロセッサ番号Iを1とし、処理103を実行することを示す。

【0123】102は、N番目のプロセッサにおいて、プロセッサ番号IをNとし、処理103を実行することを示す。

【0124】ここで、101及び102に記述された処理内容は、2番目以降(N-1)番目のプロセッサにおいても同様である。

【0125】また、101及び102は、1番目からN番目までの個々のプロセッサ上でそれぞれ処理103が行われること、及び1番目からN番目までの全てのプロセッサ上で処理103が終了した後に図1に示す全ての処理が終了することを示している。

【0126】103は、番号Iのプロセッサにおける分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ を計算する処理であり、この内容は別に記述する。

【0127】図2は、本発明の一実施例において、処理103の処理手順を示す図である。103は、一連の処理202、203、204及び201がこの順序で実行されることにより番号Iのプロセッサにおける分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ が計算されることを示したものである。

【0128】202では、NIの値をINT(m/N)とする。

【0129】ここで、INT(x)は、実数xの絶対値を超えない最大の整数値に、xと同一の符号をつけた整数値を表す。

【0130】203では、IとNとの大きさを比較し、I<Nの場合には処理206を実行し、それ以外の場合には処理207を実行する。

$$\frac{1}{N} x(m)^4$$

【0143】であり、402の(1/N)倍となる。

【0144】また、処理201の繰り返し計算数はm'である。

【0145】次に、403の繰り返し計算数は、前述の数7のようになる。

【0146】一方、205、208、209、210及

【0131】206では、N1の値を(I-1)×NI+1とし、N2の値をI×NIとする。

【0132】207では、N1の値を(I-1)×NI+1とし、N2の値をmとする。

【0133】204では、全ての正の整数の組(i, j, k, l)に対して分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ の値を0とする。ここで、i, j, k, lの値はそれぞれ

$N1 \leq i \leq N2, 1 \leq j \leq m, 1 \leq k \leq m, 1 \leq l \leq m$ である。

【0134】201は、繰返し数カウンタpが1からm'まで1ずつ増加する間、一連の処理403及び205をこの順序で繰り返すことを示す。

【0135】403は、2電子積分の部分積 $c_{pjk l}$ を計算する処理であり、この内容は別に記述する。

【0136】205は、繰返し数カウンタiがN1からN2まで1ずつ増加する間、処理208を繰り返すことを示す。

【0137】208は、繰返し数カウンタjが1からmまで1ずつ増加する間、処理209を繰り返すことを示す。

【0138】209は、繰返し数カウンタkが1からmまで1ずつ増加する間、処理210を繰り返すことを示す。

【0139】210は、繰返し数カウンタlが1からmまで1ずつ増加する間、処理211を繰り返すことを示す。

【0140】211では、原子軌道を分子軌道へ変換するための係数行列の行列要素 $U_{pi}$ の複素共役と処理403で計算した2電子積分の部分積 $c_{pjk l}$ との積を分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ に加え、この結果を $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ の新しい値とする。

【0141】以上、図1及び図2に見られるように、204の繰り返し計算数は、

【0142】

【数13】

... (数13)

び211からなる一連の処理の繰り返し計算数は、404、405、406、407及び408からなる処理の繰り返し計算数の(1/N)倍であり、

【0147】

【数14】

$$\frac{1}{N} z(m')^4$$

16

... (数14)

【0148】となる。

【0149】以上、103における繰返し計算数をまとめると

$$\frac{x}{N} (m')^4 + (y + \frac{z}{N}) (m')^5$$

【0150】

【数15】

... (数15)

【0151】となる。

【0152】すなわち、数9に示したような、ノイマン型計算機で実現した従来技術の場合に比べて、繰返し計算数を記述する項のうち $m'$ についての次数が下がる項が生じるとともに主要な項が $(1/N)$ 倍されている。

【0153】また、従来技術における最上位の繰返し処理を並列化した場合に比べて、数11に示したような、 $N$ に比例する項は全く存在しない。

【0154】なお、本実施例では原子軌道、分子軌道、及び原子軌道を分子軌道に変換する係数行列の行列要素は複素数として取り扱ったが、多くの分子軌道計算で用いられるように、これらを実数とした場合でも、繰返し計算数の大小関係は同様である。

【0155】

【発明の効果】以上に示したように、繰返し計算数の主要な項が $(1/N)$ 倍となり並列処理による高速化の利点が得られる一方で、各プロセッサの処理が終了した後もプロセッサ数 $N$ に比例する処理はまったく発生しない。したがって、プロセッサ数の大きなシステムにおいても、並列化による計算高速化の利点が損なわれることはない。

【0156】

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施例の処理手順を示す図。

【図2】本発明の一実施例において、処理103の処理手順を示す図。

20 【図3】本発明に関する従来技術及び本発明の一実施例において、2電子積分の部分 $c_{pjk l}$ を計算する処理403の内容を示す図。

【図4】本発明に関する従来技術の処理手順を示す図。

【図5】本発明に関する従来技術において、最も上位に位置する繰返し401を分割して各プロセッサに並列処理させる手順を示す図。

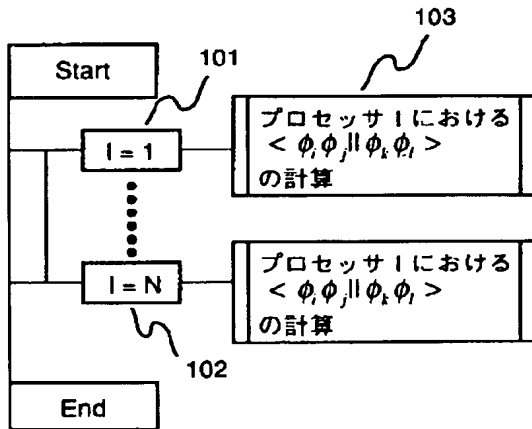
【図6】本発明に関する従来技術において、最も上位に位置する繰返し401を分割して各プロセッサに並列処理させる場合、502の処理を示す図。

30 【符号の説明】

101... 1番目のプロセッサにおいて、プロセッサ番号 $I$ を1とし、処理103を実行、102...  $N$ 番目のプロセッサにおいて、プロセッサ番号 $I$ を $N$ とし、処理103を実行、103... 番号 $I$ のプロセッサにおける分子積分 $\langle \phi_i \phi_j | | \phi_k \phi_l \rangle$ を計算する処理。

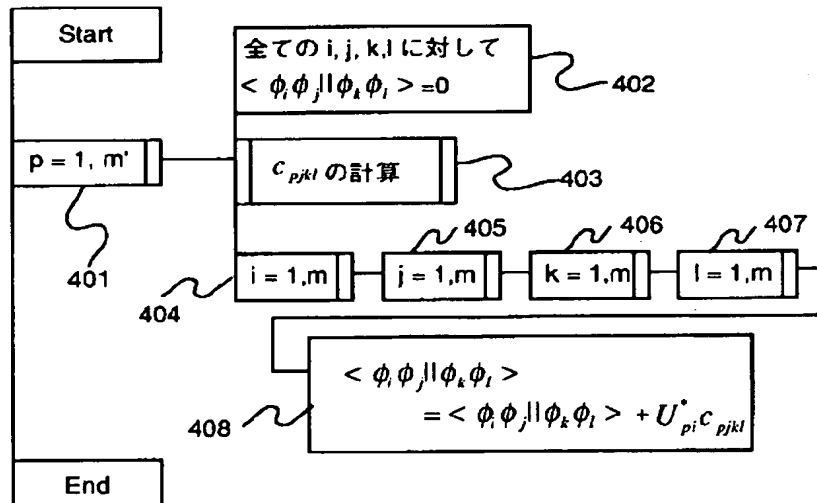
【図 1】

図 1



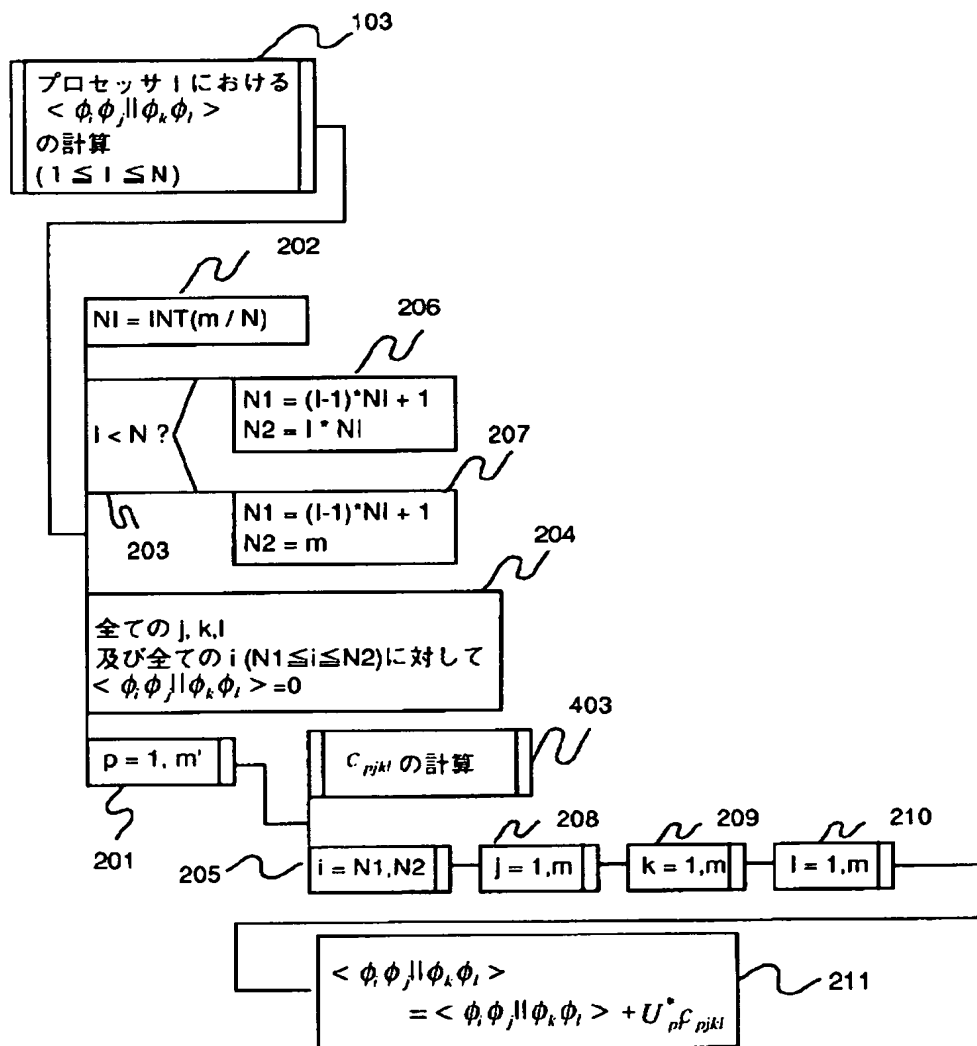
【図 4】

図 4



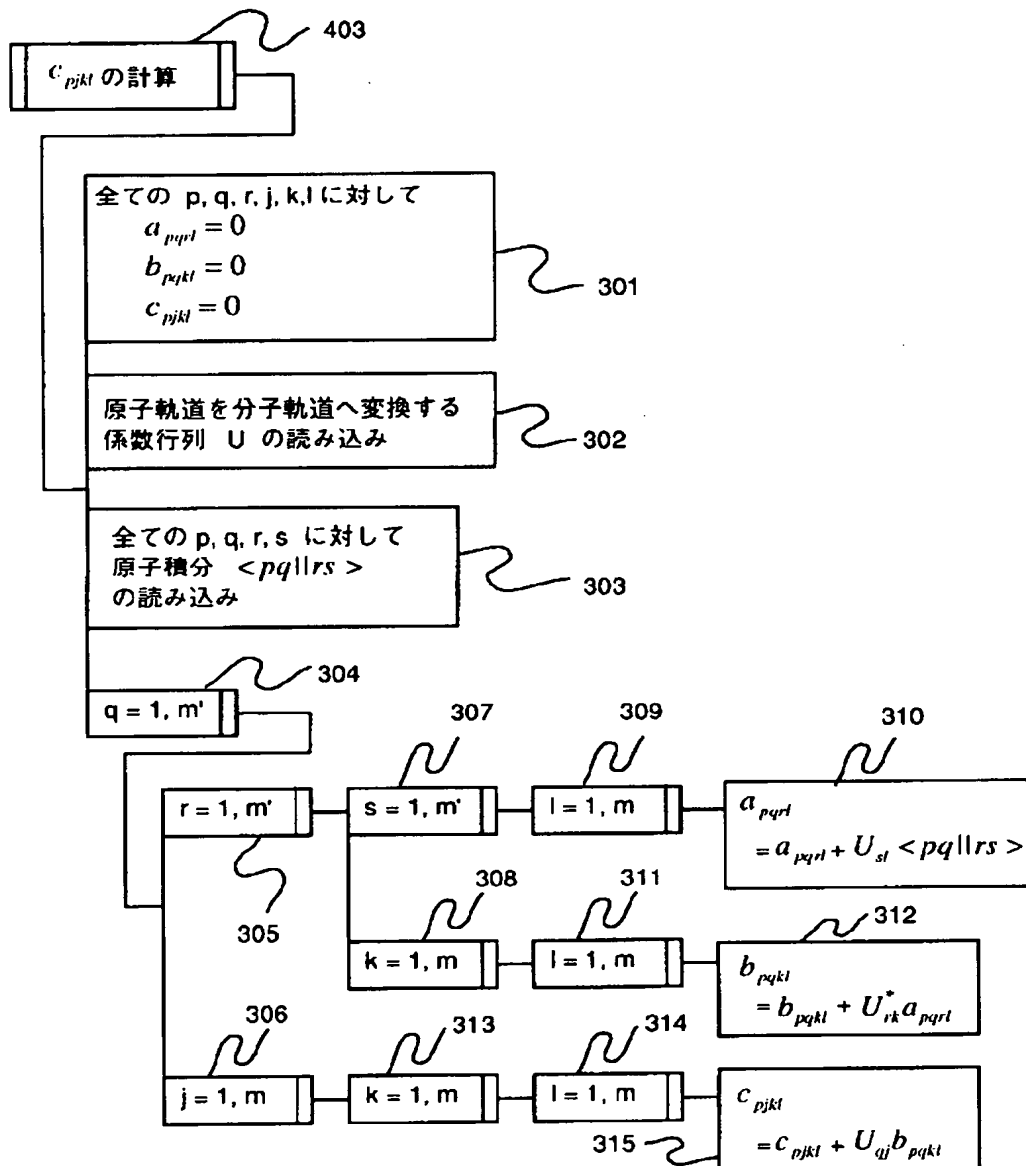
【図 2】

図 2



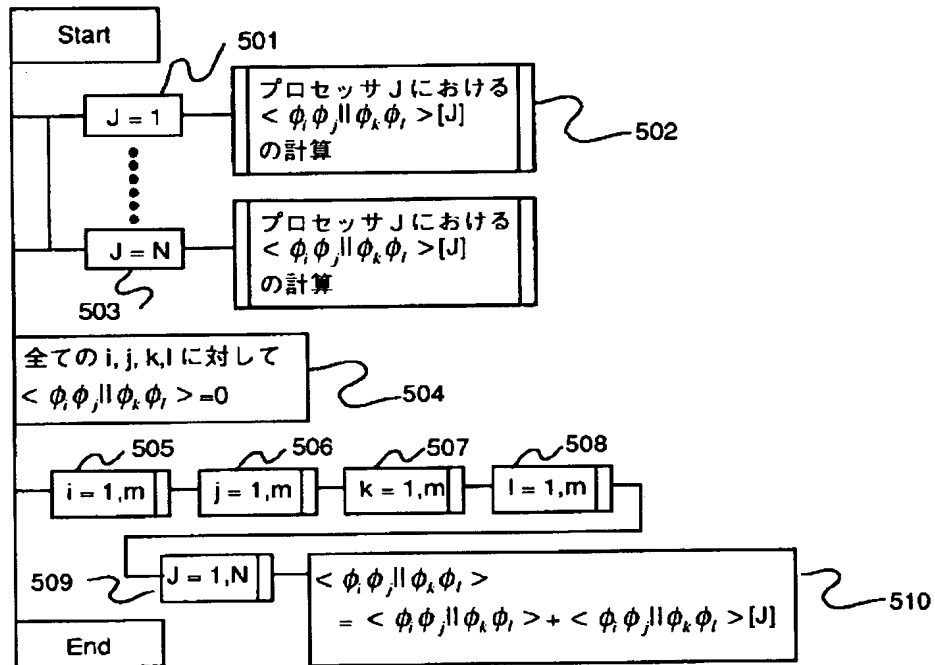
【図 3】

図 3



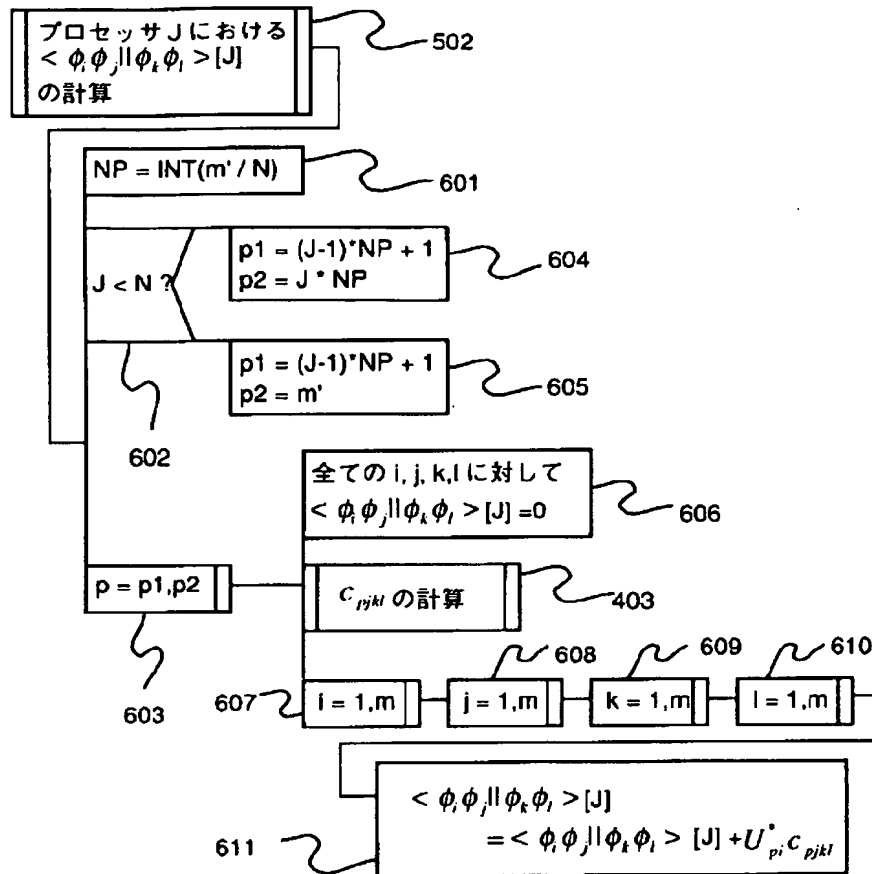
【図 5】

図 5



【図 6】

図 6



フロントページの続き

(72) 発明者 ユルゲン・シュルティ  
東京都国分寺市東恋ヶ窪 1 丁目 280 番地  
株式会社日立製作所中央研究所内